

РОЛЬ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ В ОТРИЦАТЕЛЬНОМ ТЕПЛОМ РАСШИРЕНИИ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР И НАНОТРУБОК НА ИХ ОСНОВЕ

Минакова К.А.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков*

Определение межатомных взаимодействий является ключевой проблемой динамики кристаллической решетки и многих других разделов физики твердого тела [1]. За последние годы в этой области достигнут большой прогресс, благодаря развитию и широкому применению методов расчета из первых принципов [2], а также квантово-химическим расчетам. Вместе с тем теоретические и экспериментальные исследования фононных спектров и колебательных характеристик по-прежнему остаются актуальными для решения данной задачи. Информация, получаемая на основе этих исследований, особенно важна для структур, в которых сочетаются различные типы межатомных взаимодействий. Такие соединения, как правило, имеют сложные решетки с многоатомными элементарными ячейками и отличаются заметной анизотропией взаимодействий между атомами. Причем анизотропия межатомных взаимодействий как сохраняется в дальнем порядке и приводит к сильной анизотропии упругих характеристик, так и носит локальный характер, когда направления сильной и слабой связи меняются от атома к атому. Одним из наиболее информативных методов изучения фононного спектра соединений с обоими вышеперечисленными типами анизотропии является определение и анализ температурных зависимостей их колебательных термодинамических характеристик, особенно тензорных, таких как коэффициенты линейного теплового расширения (КЛТР) вдоль различных кристаллографических направлений.

В данной работе на основе проведенных на микроскопическом уровне расчетов объяснена природа отрицательного линейного теплового расширения вдоль некоторых направлений, наблюдаемого экспериментально в ряде кристаллических соединений со сложной решеткой и анизотропным взаимодействием между атомами. Проанализированы аномалии температурной зависимости КЛТР вдоль различных направлений: в слоистых кристаллах, сформированных как моноатомными слоями (графит и графеновые нанопленки), так и многослойными «сэндвичами» (дихалькогениды переходных металлов); в многослойных кристаллических структурах типа высокотемпературных сверхпроводников, в которых анизотропия межатомного взаимодействия не сохраняется в дальнем порядке; в графеновых нанотрубках.

Результаты теоретических расчетов сопоставлены с данными рентгеновских, нейтронографических и дилатометрических измерений.

Литература:

1. Киттель. Ч. Введение в физику твердого тела / Киттель. Ч., - М., «Наука», 1978. - 792 с.
2. Kohn W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L.J. Sham // Phys. Rev – 1965 - No140 – p.1133-1138.